УДК 539.3

Г.Д.ВЕРНИГОРА, А.Н.СОЛОВЬЕВ

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ СВОЙСТВ ПЬЕЗОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ КОНЕЧНОЭЛЕМЕНТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ACELAN

Разработана методика определения полного набора эффективных физических постоянных пьезокомпозитного материала нерегулярной структуры. Метод основан на решении набора динамических задач в конечноэлементном комплексе ACELAN, для которого с этой целью разработан специальный модуль моделирования композиционных материалов. Проведены расчеты по определению электрических и механических свойств пористой керамики.
Ключевые слова: *пьезокомпозиты, МКЭ, эффективные свойства, программные модули.*

Введение. Создание высокотехнологических пьезоэлектрических преобразователей энергии напрямую зависит от разработки новых пьезоактивных материалов. Один из путей получения этих материалов является разработка композиционных материалов с одной или несколькими активными фазами. Наиболее простой по составу среди пьезокомпозитов является пористая пьезокерамика с одной активной фазой. Различные способы изготовления пористой пьезокерамики, которые позволяют варьировать характеристики материала, такие как объемное содержание, размер и распределение пор, рассматриваются, например, в [1, 2]. Изучение электрических, акустических, упругих, пьезоэлектрических и диэлектрических свойств пористой пьезокерамики и выявление их зависимостей от микроструктуры пор способа изготовления и т.д. [3, 4] является актуальной задачей. Как показано в цикле работ Т.Г. Лупейко с соавторами [5-8], пористая пьезокерамика обладает рядом свойств, которые выгодно отличают ее от сплошной керамики и которые требуют своего объяснения. Причем эти свойства в значительной степени зависят от распределения фаз (содержание, открытость или замкнутость пор, размеры и форма пор и т.п.)

Данная работа посвящена разработке методики расчета эффективных свойств пористой керамики на основе решения ряда динамических задач для представительных объемов композитов и аналитических решений для тел с эффективными свойствами. При этом решение задач для пористой керамики проводится в специализированном конечно-элементном комплексе ACELAN [9], в котором для этого разработаны модули моделирования композитов нерегулярной структуры.

Моделирование нерегулярных композитов в ACELAN. На базе этого комплекса был создан модуль, позволяющий моделировать композитные материалы нерегулярной структуры, состоящие из нескольких фаз. Это моделирование происходит на уровне конечных элементов, которые наделяются свойствами определенной фазы, случайным образом (с равномерной функцией распределения) в соответствии с заданным объемным процентным содержанием фаз. Данный модуль встроен в решатель задач об установившихся колебаниях составных упругих, электроупругих и акустических

тел, содержащих композиционные элементы. При этом предусмотрена возможность проводить множественные расчеты с определенным распределением фаз. Для управления распределением фаз разработана специальная утилита в среде Microsoft Visual Studio 2005 на языке C#, позволяющая визуализировать это распределение. Пользователю предоставляется возможность увеличивать/уменьшать масштаб изображения, а также включать/выключать отображение номеров конечных элементов. Основной функциональной особенностью данной утилиты является возможность изменения фазы конечного элемента при щелчке кнопкой мышки на его изображении. Также утилита позволяет отслеживать изменение объемного процентного содержания фаз. При моделировании пористой пьезокерамики предусмотрена возможность определения свойства поры с помощью ослабления свойств основной активной фазы умножением на коэффициент понижения и превращением ее в пассивную фазу, а также возможна проверка связности тела при рапределении пор. Первый вопрос, который возникает при моделировании пористого пьезокомпозита нерегулярной структуры, - это выбор достаточного коэффициента понижения и размера конечноэлементной сетки, такого, при котором перераспределение с сохранением процентного содержания фаз не влияет на значения величин, найденных в результате расчета и используемых для определения эффективных свойств.

Использование разработанного решателя с утилитой и выбор указанных выше параметров продемонстрируем на решении задачи о собственных колебаниях в рамках линейной теории электроупругости [10] квадратной области (в системе координат Oxz со стороной, равной $l =$ 0.009 м) в плоской постановке. Квадрат совершает колебания на первой толщинной моде в направлении вектора предварительной поляризации, параллельного оси Oz .

Краевые условия задачи имеют вид:

$$\text{при } x = \pm l/2 \quad u_1 = 0, \ \sigma_{13} = 0, \ D_3 = 0;$$

$$\text{при } z = \pm l/2 \quad \sigma_{33} = 0, \ \sigma_{13} = 0, \ \varphi = 0, \qquad (1)$$

где u_i - компоненты вектора смещений; φ - электрический потенциал; σ_{ij} - тензор напряжений; D_i - компоненты вектора электрической индукции.

В качестве материала сплошной керамики был выбран состав ЦТБС-3, свойства материала, моделирующего поры, задаются при помощи коэффициента понижения $a_p = a \cdot 10^{-n}$, где a_p - упругие модули и плотность материала, задающего поры; a - соответствующее механическое свойство материала сплошной керамики.

Первая серия экспериментов была направлена на определение коэффициента понижения. На основании графика зависимости F относительных резонансных частот первой толщинной моды ($F = \dfrac{f_p}{f_s}$, f_P - частота первой толщинной моды пористого тела, f_s - частота первой толщинной моды сплошного тела) от степени коэффициента понижения n (рис.1) можно сделать заключение, что оптимальный коэффициент понижения составляет 10^{-4} .

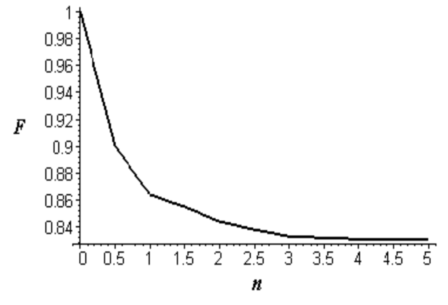


Рис.1. Зависимость относительной резонансной частоты от степени коэффициента понижения

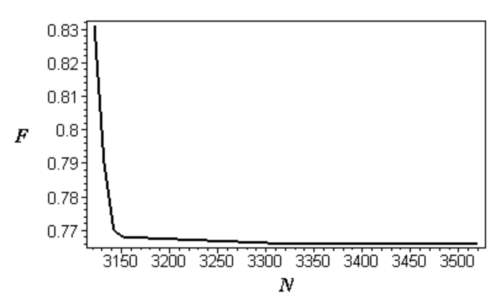


Рис.2. Зависимость относительной резонансной частоты от количества узлов конечноэлементной сетки

Дальнейшие эксперименты были нацелены на определение наиболее оптимальной дискретизации тела. Исходя из графика зависимости относительных частот первой толщинной моды от числа узлов конечноэлементной сетки (рис.2) можно сделать вывод, что количество узлов сетки должно превышать 3300 узлов. Численные расчеты, проведенные при таком количестве узлов, показали, что перераспределение пор при сохранении их объемного содержания (8,66%) не влияет на первую толщинную моду 0,20 МГц (рис.3, 4).

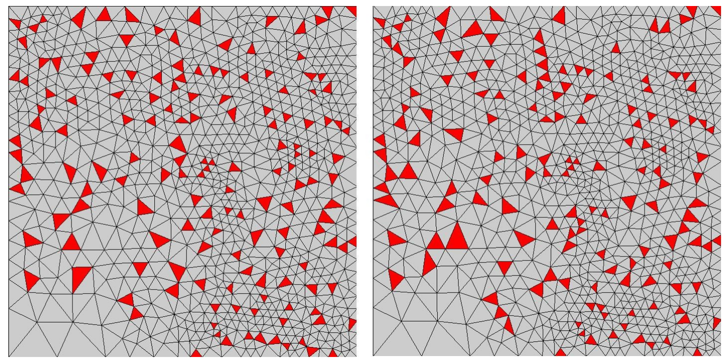


Рис.3. Первоначальное распределение и перераспределение пор в 8,66%-ном композите

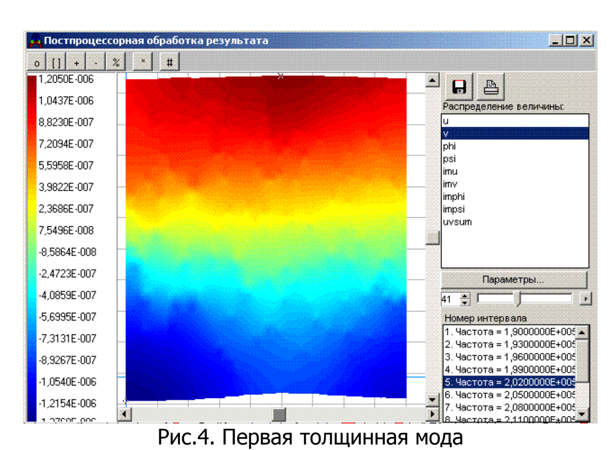


Рис.4. Первая толщинная мода

Определение эффективных свойств с помощью динамических задач. Разработанный решатель применен в задаче определения эффектив-

ных упругих и пьезоэлектрических свойств композитной пьезокерамики нерегулярной структуры. Одним из способов описания композитных пьезоматериалов является замена их эквивалентными однородными составами с некоторыми эффективными характеристиками. Задаче определения полного набора материальных констант пьезокерамики уделяется большое внимание в литературе [11, 12]. Несмотря на ряд разработанных методик [13, 14], определение этих свойств и выявление их зависимостей от рабочих параметров (частоты колебаний, температуры и т.д.) является актуальной задачей.

Далее рассматривается способ определения эффективных упругих и пьезоэлектрических свойств композитной пьезокерамики нерегулярной структуры, основанный на динамической эквивалентности ее однородной пьезокерамике. Для этого рассматриваются собственные колебания некоторых представительных объемов композита и находятся их резонансные и антирезонансные частоты. Их вычисления проводятся в конечноэлементном комплексе ACELAN. Эти частоты для ряда одномерных и двумерных движений, описывающихся аналитически, являются исходной информацией для определения эффективных констант. При этом предполагается, что ряд характеристик, таких как диэлектрические проницаемости и плотности, могут быть измерены по известным экспериментальным методикам для однородных материалов [11] (в численном эксперименте они вычислялись по соотношениям теории смесей). В качестве таких мод колебаний рассматриваются:

А) одномерные поршневые движения, параллельные вектору предварительной поляризации (толщинные моды);

Б) колебания перпендикулярно этому вектору протяженных тел со свободными границами и поршневые движения в этом направлении (продольные моды);

В) сдвиговые колебания в направлении вектора поляризации.

В рамках линейной теории электроупругости [10] рассматриваются собственные колебания прямоугольных тел в плоской постановке. В качестве материала сплошной керамики, как и ранее, был выбран ЦТБС-3, имеющий следующие механические свойства:

$$C = \begin{pmatrix} 15.1 & 7.9 & 8.0 & 0 & 0 & 0 \\ & 15.1 & 8.0 & 0 & 0 & 0 \\ & & 13.6 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 2.9 & 0 & 0 \\ & & & & 2.9 & 0 \\ & \text{симм} & & & & 3.6 \end{pmatrix};$$

$$E = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 15.4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 15.4 & 0 & 0 \\ -7.9 & -7.9 & 17.7 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} 14288.5 & 0 & 0 \\ 0 & 14288.5 & 0 \\ 0 & 0 & 11328 \end{pmatrix},$$

где $C \cdot 10^{10}\, Н/м^2$ - матрица упругих модулей; E - матрица пьезомодулей; $\varepsilon \cdot 10^{-12}\, Ф/м$ - матрица диэлектрических проницаемостей.

Решение задачи с граничными условиями (1) ищем в виде:

$$u_1(x,z) = 0\,,\; u_3(x,z) = U_z(z)\,,\; \varphi(x,z) = \Phi(z)\,. \qquad (2)$$

Уравнения, определяющие частоты резонанса и антирезонанса имеют вид:

$$tg\left(\frac{1}{2}\omega_r \frac{l}{k_3}\sqrt{t^2+1}\right) = \frac{1}{2}\omega_r \frac{l}{k_3}\frac{\sqrt{t^2+1}}{t^2}\;;\;\; \omega_a = n\pi\frac{k_3}{l}\sqrt{1+t^2}\,, \qquad (3)$$

где $t^2 = \dfrac{{e_{33}}^2}{\varepsilon_{33}c_{33}}$, $k_i = \sqrt{\dfrac{c_{ii}}{\rho}}$, $i = 1,3,5$, ω_r, ω_a - собственные частоты резонанса и антирезонанса в толщинных колебаниях, ε_{ij}, e_{ij}, c_{ij} - эффективные компоненты тензоров диэлектрической проницаемости, пьезоконстант, упругих постоянных.

Краевые условия задачи ***Б₁*** имеют вид:

при $x = \pm l/2$ $\sigma_{11} = 0$, $\sigma_{13} = 0$, $D_1 = 0$;

при $z = \pm h/2$ $\sigma_{33} = 0$, $\sigma_{13} = 0$, $\varphi = 0$. (4)

В предположении, что $l >> h$ и $\sigma_{33}(x,z) \equiv 0$ решение задачи ищется в виде:

$$u_1(x,z) = U_x(x)\,;\; u_3(x,z) = U_z(z)\,;\; \varphi(x,z) = \Phi(z)\,. \qquad (5)$$

Уравнения, определяющие частоты резонанса и антирезонанса, имеют вид:

$$\omega_r = (2n-1)\pi\frac{k_1}{l}\sqrt{1-g^2}\;;$$

$$tg\left(\frac{1}{2}\omega_a \frac{l}{k_3}\sqrt{1-g^2}\right) = \frac{1}{2}\omega_a \frac{l}{k_3}\sqrt{1-g^2}\,\frac{(1-t^2)(1-g^2)c}{t^2(ec-1)^2}\,, \qquad (6)$$

где $g^2 = \dfrac{{c_{13}}^2}{c_{11}c_{33}}$, $e = \dfrac{e_{31}}{e_{33}}$, $c = \dfrac{c_{33}}{c_{11}}$.

Краевые условия задачи ***Б₂*** имеют вид:

при $x = \pm l/2$ $\sigma_{11} = 0$, $\sigma_{13} = 0$, $D_1 = 0$;

при $z = \pm h/2$ $u_3 = 0$, $\sigma_{13} = 0$, $\varphi = 0$. (7)

Решение задачи ищется в виде:

$$u_1(x,z) = U_x(x)\,;\; u_3(x,z) = 0\,;\; \varphi(x,z) = 0\,. \qquad (8)$$

Уравнения, определяющие частоты резонанса, имеют вид

$$\omega_r = (2n-1)\pi\frac{k_1}{l}\,. \qquad (9)$$

Краевые условия задачи ***В*** имеют вид:

при $x = \pm l/2$ $\sigma_{11} = 0$, $\sigma_{13} = 0$, $\varphi = 0$;

при $z = \pm h/2$ $\sigma_{33} = 0$, $\sigma_{13} = 0$, $D_3 = 0$. (10)

Решение задачи ищется в виде:

$$u_1(x,z) = 0\,;\; u_3(x,z) = U_z(x)\,;\; \varphi(x,z) = \Phi(x)\,. \qquad (11)$$

Уравнения, определяющие частоты резонанса и антирезонанса имеют вид [15]:

$$Z = 0, \qquad Z = \infty, \qquad (12)$$

где $Z = \frac{1}{2}\omega_a \frac{l}{k_5} - \frac{d^2}{1+d^2} tg\left(\frac{1}{2}\omega_a \frac{l}{k_5}\right)$, $d = \frac{g_{15}^2}{s_{55}\beta_{11}^T}$.

Таким образом, система уравнений (3),(6),(9),(12) на каждой гармонике представляет собой систему семи уравнений относительно семи неизвестных: c_{11}, c_{13}, c_{33}, c_{55}, e_{31}, e_{33}, e_{15} - эффективных констант плоской задачи теории электроупругости для материалов класса $6mm$. При этом предполагается, что диэлектрические проницаемости измерены в эксперименте. Для их численно аналитического нахождения могут быть рассмотрены аналогичные задачи для осесимметричных представительных объемов.

В качестве результатов численного эксперимента приведем данные о нахождении модуля упругости c_{33} и пьезоконстанты e_{33} на основе уравнений (3) и результатов расчета частот резонанса и антирезонанса представительного объема 10,0% и 23,0% пористой керамики нерегулярной структуры в комплексе ACELAN (таблица).

Результаты численного эксперимента

	Константы пьезокерамики ЦТБС-3	Эффективные константы пористой керамики	
		Объемное содержание пор-10% f_r =202.2 кГц, f_a =220.4 кГц	Объемное содержание пор-23.0% f_r =165.5 кГц, f_a =184.8 кГц
e_{33}	$17{,}7 Кл/м^2$	$13{,}717 Кл/м^2$	$11{,}177 Кл/м^2$
c_{33}	$13{,}6\times10^{10} Н/м^2$	$8{,}131\times10^{10} Н/м^2$	$4{,}713\times10^{10} Н/м^2$

Заключение. Разработанная методика позволяет определять эффективные свойства пористой пьезокерамики для известного состава пьезокерамики и процентного содержания пор на основе проведения численных расчетов в конечноэлементных пакетах, в которых возможно моделирование композитов нерегулярной структуры. Проведение натурных экспериментов для макрообъемов пьезокомпозитов по известным методикам [11] в тех случаях, когда это возможно осуществить, позволит уточнить данные численного эксперимента.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (коды проектов 07-08-13589, 07-08-12193).

Библиографический список

1. *E. Roncari, C. Galassi, F. Craciun, C. Capiani, A. Piancastelli*. A microstructural study of porous piezoelectric ceramics obtained by different methods. // Journal of the European Ceramic Society, 2001. V. 21, pp. 409-417.

2. *Carmen Galassi*. Processing of porous ceramics: Piezoelectric materials. // Journal of the European Ceramic Society, 2006. V. 26, pp. 2951–2958.

3. *H.L. Zhang, Jing-Feng Li, Bo-Ping Zhang.* Microstructure and electrical properties of porous PZT ceramics derived from different pore-forming agents. // Acta Materialia, 2007. V. 55, pp. 171–181.

4. *Наседкин А.В.* О некоторых численных эксперементах по расчету эффективных модулей пористой пьезокерамики / А.В. Наседкин // Совр. пробл. мех. спл. среды: Тр. VIII Междунар. конф., Ростов-на-Дону, 14-18 окт. 2002. – Ростов н/Д: Новая книга, 2003. - Т.1. - С.111-115.

5. *Lupeiko T.G., Lopatin S.S.* Old and New Problems in Piezoelectric Materials Research: Materials with igh Hydrostatic Sensitivity. // Inorganic Materials. 2004. V. 40. Suppl. 1. P. 19-32.

6. *Лупейко Т.Г.* Зависимость объемной чувствительности пористых пьезоэлементов от их пористости и толщины. / Т.Г. Лупейко, С.Н. Свирская, А.С. Пахомов, М.А. Вовк // Огнеупоры и техническая керамика. - 2004. - Т.1.- С.28-32.

7. *Лупейко Т.Г.* Композиционное конструирование новых активных материалов и его возможности. / Т.Г. Лупейко // Материалы XVII Менделеевского съезда по общей и прикладной химии. Секция В. Материалы и нанотехнологии. – Казань, 2003. - С.252.

8. *Лупейко Т.Г.* Размерные эффекты активных композиционных материалов и пористая пьезокерамика. / Т.Г. Лупейко, В.Н. Зяблин, П.М. Бадалян // Сборник трудов 7-го Международного симпозиума «Порядок, беспорядок и свойства оксидов». – Ростов н/Д-Лоо, 2004. – С.135-38.

9. *Белоконь А.В.* Новая версия пакета ACELAN для для проведения расчетов пьезоизлучателей и пьезоприемников акустических волн. / А.В. Белоконь, А.В. Наседкин, А.В. Никипаев, А.Л. Петушков, А.С. Скалиух, А.Н. Соловьев // Пьезотехника-2002. Междунар. научно-пракич. конф. "Фундамент. проблемы пьезоэлектрич. приборостроения". - Тверь, 17-21 сент. 2002г. Сб. докл. Тверь: ТвГУ, 2002. - С.171-179.

10. *Партон В.З.* Электромагнитоупругость пьезоэлектрических и электропроводных тел. / В.З. Партон, Б.А. Кудрявцев. - М.: Наука, 1988. - 472 с.

11. *Акопьян В.А.* Теоретико-экспериментальные методы определения полного набора совместимых материальных констант в теории электроупругости: дис…. канд. техн. наук. – Ростов н/Д, 2005. ДГТУ. – 206 с.

12. *Гетман И.П.* Об эффективных характеристиках пьезоактивных композитов с цилиндрическими включениями. / И.П. Гетман, В.А. Мольков. // ПММ. – 1992. - Т.35. - №3. - С.501-509.

13. *Бондарев П.М.* Разработка численно-аналитических методов расчета эффективных характеристик пьезокомпозитов 3-0 и 1-3 связности: дис…. канд. физ.-мат. наук. – Ростов н/Д: РГУ, 2002. – 127 с.

14. *Наседкин А.В.* О некоторых численных эксперементах по расчету эффективных модулей пористой пьезокерамики / А.В. Наседкин // Совр. пробл. мех. спл. среды: Тр. VIII Междунар. конф., Ростов-на-Дону, 14-18 окт. 2002. – Ростов н/Д: Новая книга, 2003. - Т.1. - С.111-115.

15. *Шульга Н.А.* Колебания пьезоэлектрических тел. / Н.А. Шульга, А.М. Болкисев. – Киев: Наукова Думка, 1990. – 228 с.

Материал поступил в редакцию 11.02.09.

G.D. VERNIGORA, A.N. SOLOVIEV

IDENTIFICATION OF EFFECTIVE PROPERTIES OF PIEZOCOMPOSITES ON THE BASE OF FEM MODELING WITH ACELAN

The unit of FEM package ACELAN for composite materials problems solving is developed. Effective properties of piezocomposite materials (porous ceramics) on the basis of equivalence of modal properties of several representative volumes of composite and respected anisotropic solid are determined.

СОЛОВЬЕВ Аркадий Николаевич (р.1954), заведующий кафедрой «Сопротивление материалов» ДГТУ, доктор физико-математических наук (2005), профессор. Окончил Ростовский-на-Дону государственный университет (1976).
Имеет более 200 научных публикаций в области механики деформируемых твердых тел.
asoloviev@dstu.edu.ru

ВЕРНИГОРА Галина Дмитриевна, аспирант кафедры «Сопративление материалов». Окончила ЮФУ (2007).
Научные интересы: механика деформируемых тел.
Имеет 5 публикаций.